Symulacje PIC plazmy w źródle jonów ujemnych

Streszczenie. W artykule zaprezentowano bazujący na metodzie Particle-In-Cell model numeryczny plazmy w źródle jonów ujemnych. Omówiono wpływ napięcia ekstrakcyjnego na rozkład potencjału i gęstości składników plazmy. Zaobserwowano powstawanie bariery potencjału w pobliżu powierzchni emitującej jony H-, jak również nietypowy (mający dwa maksima) profil gęstości ładunku w ekstrahowanej wiązce jonów H-. Otrzymana na drodze symulacji krzywa prądowo-napięciowa ulega nasyceniu dla napięć ekstrakcyjnych powyżej 20 kV.

Abstract. A Particle-In-Cell method based numerical model of plasma inside a negative ion source is presented. Influence of the extraction potential on the distributions of potential and plasma components inside the chamber is considered. A potential barrier neart the H- emitting surface is observed, as well as non-typical (characterised by two peaks) profile of the extracted H beam. A saturation of the calculated current-voltage is observed for extraction voltages above 20 kV. (**PIC simulations of plasma inside the negative ion source**).

Słowa kluczowe: źródła jonów ujemnych, symulacje komputerowe, metoda Particle-In-Cell **Keywords:** negative ion sources, computer simulations, Particle-In-Cell method.

Wstęp

Wytwarzanie wiązek jonów ujemnych o dużym natężeniu prądu jonowego [1] wydaje się być zadaniem niezwykle pilnym m.in. w świetle ich możliwego zastosowania w testowym reaktorze termojądrowym ITER. Systemy wstrzykiwania cząstek nienaładowanych (NBI – *Neutral Beam Injection*) o mocy rzędu dziesiątek megawatów [2] uznaje się za jedne z najefektywniejszych systemów grzania plazmy w tokamakach, zaś źródła jonów ujemnych H-/D- z wyładowaniem o częstości radiowej wyposażone w wielosiatkowy, wielootworowy system ekstrakcyjny [3] są jego zasadniczymi elementem.

Symulacje komputerowe od wielu lat wspierają proces projektowania i optymalizacji źródeł jonowych. W ostatnich latach powstało wiele prac poświęconych modelowaniu źródeł jonów ujemnych i formowaniu wiązek wytworzonych przez te urządzenia. W pracach tych wykorzystywano zarówno modele jedno- [4], dwu- [5] jak i trójwymiarowe [6-9]. Symulacje wykazały m.in. znaczący wzrost nateżenia ekstrahowanego prądu jonów ujemnych na skutek zastosowania filtra magnetycznego o indukcji rzędu kilkudziesięciu mT w rejonie ekstrakcji [10-12]. Efekt ten był także obserwowany w eksperymentach [13]. Warto w tym miejscu wspomnieć, że symulacje produkcji, transportu i ekstrakcji jonów prowadzone są z wykorzystaniem zarówno modeli bazujących na śledzeniu trajektorii cząstek próbnych, jak i modeli samozgodnych bazujących na metodzie Particle-in-Cell [14].

W artykule zaprezentowano dwuwymiarowy, bazujący na metodzie Particle-In-Cell, samozgodny model plazmy złożonej z jonów H⁺, H⁻ i elektronów. Model ten przypomina model trójwymiarowy opisany w pracach, jednakże obniżenie wymiarowości pozwala zmniejszyć wysiłek obliczeniowy w rozważanym przypadku. Zastosowana została dość uproszczona geometria źródła jonów ujemnych: komora posiada pojedynczy otwór ekstrakcyjny a jony przyciągane są przez płaską elektrodę ekstrakcyjną położona w pewnej odległości od komory. W odróżnieniu od wcześniejszych prac [10, 11] zakłada się, że jony ujemne przede procesie produkowane wszystkim są w powierzchniowym, co jest symulowane przez ich emisję do wnętrza komory ze ścianki z otworem ekstrakcyjnym.

Artykuł zawiera opis zastosowanego modelu jak również omówienie wstępnych wyników symulacji. Badany był wpływ napięcia ekstrakcyjnego na rozkłady gęstości składników plazmy jak również na rozkład potencjału wewnątrz komory źródła jonów. Dyskusji poddane zostały rozkłady potencjału i profile gęstości składników plazmy w pobliżu powierzchni emitującej jony ujemne. Zmieniając potencjał elektrody ekstrakcyjnej uzyskano krzywą prądowo-napięciową dla ekstrahowanych jonów.

Model

W obliczeniach numerycznych wykorzystano dwuwymiarowy model komory plazmowego źródła jonów z pojedynczym otworem ekstrakcyjnymi. Uproszczony schemat modelowanego układu pokazany jest na rysunku 1. Płaska elektroda ekstrakcyjna znajduje się w odległości 10 mm od komory. Obszar symulacji pokryty został prostokątną siatką numeryczną o rozmiarach komórki $\Delta x = \Delta y = 0,1 \text{ mm}$, co przy gęstości elektronów 10^{-16} m^{-3} sprawia, że rozmiar komórki jest istotnie mniejszy od promienia Debye'a plazmy. Większa dostępna moc obliczeniowa umożliwiła zastosowanie kroku obliczeniowego $\Delta t = 0.5 \times 10^{-11}$ s, mniejszego niż w pracy [15], co gwarantuje że cząstki w trakcie pojedynczego kroku nie pokonują dystansu większego niż rozmiar komórki, co korzystnie wpływa na stabilność symulacji.



Rys.1. Schemat symulowanego układu

Wykorzystano samozgodną metodę PIC [16], w której jedna cząstka obliczeniowa reprezentuje dużą grupę (liczącą tysiące bądź miliony) rzeczywistych cząstek poruszających się w identyczny sposób. Po obliczeniu nowych położeń wszystkich cząstek obliczeniowych przypisuje się ich ładunek do węzłów siatki numerycznej, a na podstawie tego dyskretnego rozkładu oblicza potencjał elektrostatyczny i nowe wartości sił działających na cząstki.

Założono, że plazma w komorze źródła składa się początkowo z równej ilości jonów H⁺ i elektronów, przy czym każdy z tych grup reprezentowana jest przez 3 mln

cząstek obliczeniowych. Początkowe położeniach tych cząstek są generowane przypadkowo, tak że wypełniają one niemal cały obszar komory, schematycznie zaznaczony kolorem szarym na rysunku 1. Założono, że początkowe wartości cząstek odpowiadają temperaturze 1 eV, zarówno w przypadku jonów jak i elektronów. Ładunki cząstek obliczeniowych przypisywane są zawsze do najbliższych węzłów siatki, co jest najprostszym i najszybszym schematem dystrybucji ładunku. Potencjał elektrostatyczny obliczany jest przez rozwiązywanie równania Poissona:

(1)
$$\nabla V(x,y) = \frac{\rho(x,y)}{\varepsilon_{c}}$$

z wykorzystaniem metody kolejnych nadrelaksacji [17], przy uwzględnieniu warunków brzegowych narzucanych przez potencjały elektrod. Kolejnym etapem jest obliczenie składowych natężenia pola elektrostatycznego w węzłach siatki przy wykorzystaniu różniczkowania numerycznego. Schemat przypisywania sił elektrostatycznych działających na cząstkę jest identyczny jak w przypadku dystrybucji ładunku do siatki. Równania ruchu czastek całkowane sa przy użyciu algorytmu Verleta [18]. W trakcie symulacji cząstki, które uderzyły w elektrody bądź opuściły komorę źródła przez otwór ekstrakcyjny zastępowane są nowymi cząstkami, których położenie generowane jest przypadkowo w obszarze całej komory, tak by zachować neutralność plazmy. Cząstki reprezentujące jony H emitowane są (w liczbie $N_{H_{-}}$ na jeden cykl symulacji) z wewnętrzej powierzchni elektrody z otworem ekstrakcyjnym, jak pokazane na rysunku 1. Ich początkowe prędkości odpowiadają energii 0,25 eV. Proces emisji uaktywniany jest po ustabilizowaniu się rozkładu potencjału w komorze jonizacji, zazwyczaj po kilkunastu lub kilkudziesięciu cyklach symulacji. Trajektorie jonów H⁻ ulegają zaburzeniu na skutek zderzeń z innymi naładowanymi składnikami plazmy. Proces ten jest symulowany przy wykorzystaniu metody Monte Carlo bazującej na przybliżeniu zderzeń binarnych [19].

Program umożliwia rejestrowanie zmian wartości potencjału elektrostatycznego w wybranych punktach komory, zapisywanie rozkładów gęstości poszczególnych składników plazmy oraz rozkładu potencjału jak również rejestrowanie natężenia prądu ekstrahowanych cząsteczek, co umożliwia obliczanie krzywych prądowo-napięciowych.



Rys.2. Ewolucja potencjału elektrostatycznego w dwu wybranych punktach komory

Wyniki

Ewolucja czasowa potencjału elektrostatycznego w wybranych punktach komory źródła jonów (w pobliżu otworu ekstrakcyjnego i tylnej ścianki) zilustrowana została na rysunku 2. Zaprezentowano wyniki uzyskane dla napięcia ekstrakcyjnego 2 kV i 200000 iteracji. Początkowo silne oscylacje zanikają po około 30000 krokach, ustala się stan kwazistacjonarny a potencjał wewnątrz komory źródła ma wartość około -5 V. Zaobserwować można tez bardzo szybkie oscylacje potencjału o częstości odpowiadających częstości plazmy o zadanej gęstości. Po 30000 iteracjach rozpoczyna się wstrzykiwanie jonów H⁻ do wnętrza komory z tempem N_{H} =100.



Rys.3. Rozkłady potencjału elektrostatycznego po 200 tys. iteracji uzyskane dla różnych wartości $V_{\rm exr}$

Rysunek 3 przedstawia rozkłady potencjału po 200000 krokach symulacji uzyskane dla różnych wartości napięcia ekstrakcyjnego. Widać powiększanie się obszaru menisku, który dla V_{ext} = 1 kV nie wnika w zasadzie w głąb komory, a dla V_{ext} = 50 kV sięga nawet 3 mm od wewnętrznej krawędzi obszaru ekstrakcyjnego. Ponadto godny uwagi jest fakt, że im większe jest napięcie ekstrakcyjne, tym mniej rozległy jest obszar obniżenia potencjału w okolicach powierzchni emitujących jony H⁻.

Wspomniane zmiany warto analizować w powiązaniu ze zmianami gęstości poszczególnych składników plazmy, zilustrowanych na rysunku 4. Rozkłady te otrzymano dla tych samych momentów czasu i napięć ekstrakcyjnych. Widać powiększanie się obszaru menisku, zwłaszcza na rozkładach gęstości jonów H⁺ i elektronów. Ponadto obszar o dużej gęstości elektronów odsuwa się wraz ze wzrostem V_{ext} w głąb komory, co także jest związane z coraz większym obszarem menisku plazmy. Ogniskowanie wiązki wynikające z krzywizny powierzchni emitującej cząstki jest szczególnie dobrze widoczne w przypadku elektronów. Rozkład gęstość wiązki jonów H⁻ w płaszczyźnie otworu ekstrakcyjnego ma dwa wierzchołki, co widać jeszcze lepiej.



Rys.4. Rozkłady gęstości (od lewej) jonów H⁺ elektronów i jonów H⁻ po 200 tys. iteracji uzyskane dla różnych wartości V_{ext}

Opisy na rysunku muszą być czytelne, nie mogą być na rysunku 5. Wynika to z faktu, że większość ekstrahowanych jonów pochodzi z obszaru ścianki bezpośrednio przyległego do otworu ekstrakcyjnego. Powoduje to powstawanie łukowatych rozkładów gęstości jonów ujemnych biorących swój początek w krawędziach ścianek. Należy też mieć na uwadze, że do spychania jonów H w pobliże krawędzi otworu ekstrakcyjnego przyczynia się ładunek przestrzenny od ekstrahowanych elektronów.







punktach komory

Rys.6. Profile (wzdłuż linii y = 2,5 mm) wartości energii potencjalnej jonu H (a), gęstości jonów H (b) oraz elektronów (c) w pobliżu powierzchni emitującej

Na rysunku 4 widać, że obszar ich dużej koncentracji znajduje się centralnej części otworu ekstrakcyjnego. Warto także zauważyć, że im większe jest V_{ext} , tym więcej jonów H przedostaje się w głąb komory, przy czym w każdym z rozpatrywanych przypadków największa koncentracją tych cząstek jest w pobliżu powierzchni emitującej, co prowadzi powstania wspomnianego wcześniej do obniżenia potencjału. Najlepiej widać to na rysunku 6, na którym przedstawiono profile wartości energii potencjalnej jonów ujemnych i gestości składników plazmy wzdłuż prostej y=2,5 Mm w pobliżu powierzchni emitującej. Stosunkowo powolne jony H⁻ gromadzą się w pobliżu wspomnianej powierzchni tworząc warstwę o grubości ok 0,2-0,3 mm, gdyż są więzione w studni potencjału o głębokości kilku elektronowoltów. Gęstość bardziej ruchliwych elektronów jest mniejsza w pobliżu ścianki, w tym rejonie jony H przejmują rolę czynnika równoważącego dodatni ładunek jonów H^{*}. Należy zwrócić uwagę na fakt, iż głębokość studni maleje od około 7 eV dla V_{ext} = 1 kV do 5 eV dla V_{ext} = 50 kV, zaś koncentracja jonów H⁻ w rejonie odległym od ścianki zauważalnie rośnie wraz z V_{ext}.



Rys.7. Krzywa prądowo-napięciowa dla jonów H⁻ dla N_H=100

Rysunek 7 przedstawia krzywą prądowo-napięciową dla jonów H⁻ uzyskaną dla N_{H} =100 i napięcia ekstrakcyjnego do 70 kV. Za wartość natężenia prądu jonowego odpowiadającego danemu V_{ext} przyjęto średnią wartość z ostatnich 20 tys. kroków symulacji. Obserwowany jest dość szybki wzrost natężenia prądu dla napięć poniżej 20 keV. Dla wyższych wartości V_{ext} widoczne jest nasycenie krzywej prądowo-napięciowej. Ekstrahowanie intensywniejszych prądów jonowych jest możliwe albo przez zwiększenie intensywności produkcji jonów H⁻ na powierzchni, albo przez inne ukształtowanie otworów ekstrakcyjnych.

Podsumowanie

W artykule omówiono dwuwymiarowy model plazmy źródle jonów ujemnych bazującym na jonizacji w powierzchniowej. Program numeryczny umożliwia m.in. obliczenia rozkładu potencjału i gęstości składników plazmy wewnątrz komory źródła, jak również krzywych prądowo napięciowych. Analizujac wyniki obliczeń przeprowadzonych dla różnych wartości napiecia ekstrakcyjnego zauważono zmniejszenie się wraz z Vext wysokości bariery potencjału w pobliżu powierzchni emitującej jony, jak również towarzyszący temu wzrost koncentracji jonów H w głębi komory, jak również wzrost powierzchni menisku plazmy. Potencjał plazmy wewnątrz komory źródła jest ujemny (rzędu kilku eV) na skutek emisji jonów H⁻. Zaobserwowano dość nietypowy (z dwoma maksimami) rozkład gęstości jonów H w ekstrahowanej wiązce wynikający z faktu, iż ekstrahowane jony pochodzą głównie z krawędzi powierzchni emitującej oraz wpływu ładunku przestrzennego elektronów. Należy oczekiwać, że zastosowanie filtra magnetycznego w obszarze ekstrakcji jak również innej geometrii kanału ekstrakcyjnego istotnie zmieni profil ekstrahowanej wiązki. Przedstawiono także krzywą prądowo-napięciową obliczoną dla N_{H-} = 100. Widoczne jest nasycenie tej zależności dla Vext większych niż 20 keV. Uzyskiwanie większych natężeń ekstrahowanej wiązki wymaga innego kształtu otworu ekstrakcyjnego i/lub zwiększenia tempa produkcji jonów H⁻.

Autor: dr Marcin Turek, Instytut Fizyki, Uniwersytet Marii Curie-Skłodowskiej, pl. Marii Curie-Skłdowskiej 1, 20-031 Lublin, E-mail: mturek@kft.umcs.lublin.pl.

LITERATURA

- [1] Franzen P., Schiesko L., Froschle M., Wunderlich D., Fantz U. and the NNBI-Team, Magnetic filter field dependence of the performance of the RF driven IPP prototype source for negative hydrogen ions, *Plasma Phys. Control. Fusion* 53 (2011), 115006
- [2] Hemsworth R., Tanga A., Antoni V., Status of the ITER neutral beam injection system, Rev. Sci. Instrum. 79 (2008), 02C109
- [3] Speth E., Falter H.D., Franzen P., Fantz U. et al, Overview of the RF source development programme at IPP Garching Nucl. Fusion 46 (2006), 220
- [4] Wunderlich D., Gutser R., Fantz U., PIC code for the plasma sheath in large caesiated RF sources for negative hydrogen ions, *Plasma Sources Sci. Technol.*, 18 (2009) 045031
 [5] Boeuf J.P., Claustre J., Chaudhury B., Fubiani G., Physics of
- [5] Boeuf J.P., Claustre J., Chaudhury B., Fubiani G., Physics of a magnetic filter for negative ion sources. II. E × B drift through the filter in a real geometry, *Phys. Plasmas* 19 (2012), 113510
- [6] Mochalskyy S., Lifschitz A.F., Minea T., Extracted current saturation in negative ion sources, *J. Appl. Phys.* 111 (2012), 113303
- [7] Mochalskyy S., Lifschitz A.F., Minea T., 3D modelling of negative ion extraction from a negative ion source, *Nucl. Fusion* 50 (2010), 105011
- [8] Taccogna F., Minelli P., Longo S., 3D modelling of negative ion extraction from a negative ion source *Plasma Sources Sci. Technol.* 22 (2013), 045019
- [9] Wünderlich D., Gutser R., Fantz U., Influence of Magnetic Fields and Biasing on the Plasma of a RF Driven Negative Ion Source AIP Conference Proc. 925 (2007), 46
- [10] Turek M., Sielanko J., Franzen P., Speth E., Influence of transversal magnetic field on negative ion extraction process in 3D computer simulation of the multi-aperture ion source, *AIP Conference Proc.* 812 (2006), 153
- [11] Turek M., Sielanko J., Simulations of negative ion extraction from a multi-aperture ion source in the presence of the magnetic filter, Vacuum, 83 (2009), 256
- [12] Sakurabayashi T., Hatayama A., Bacal M., Effects of a weak transverse magnetic field on negative ion transport in negative ion sources, J. Appl. Phys. 95 (2004), 3937
- [13] Bacal, M. Bruneteau J., Devynck P., Method for Extracting Volume Produced Negative Ions, *Rev. Sci. Instrum.* 59 (1988), 2152
- [14] Wünderlich D., Mochalskyy S., Fantz U., Franzen P. and the NNBI-Team, Modelling the ion source for ITER NBI: from the generation of negative hydrogen ions to their extraction, *Plasma Sources Sci. Technol.* 23 (2014), 015008
- [15] Turek M., Symulacje transportu jonów H wytworzonych poprzez jonizację powierzchniową *Elektronika* 52 (2011), vol.11, 64
- [16] Hockney, R., Eastwood J., Computer Simulation Using Particles, Mir, Moscow, 1987
- [17] Young D.M. Iterative methods for solving partial difference equations of elliptical type (PhD Thesis, Harvard University 1950)
- [18] Swope W.C., Andersen H.C. et al., A computer simulation method for the calculation of equilibrium constants for the formation of physical clusters of molecules: Application to small water clusters *J. Chem. Phys.* 76 (1982), 637
- [19] Ma S., Sydora R.D., Dawson J.M., Binary collision model in gyrokinetic simulation plasmas, *Comp. Phys. Comm.* 77 (1993), 190